第 51 卷 第 1 期 金属学报 Vol.51 No.1
2015 年 1 月 第107-113页 ACTA METALLURGICA SINICA Jan. 2015 pp.107-113

含缺陷金属Ti力学性能的模拟研究*

梁 力 马明旺 谈效华 向 伟 王 远 程焰林

(中国工程物理研究院, 绵阳 621999)

摘 要 利用分子动力学模拟方法分别研究了空位、自间隙杂质原子、杂质He原子等缺陷对金属Ti样品的力学性能的影响. 对完整晶格的金属Ti在不同拉伸应变速率下的应力-应变曲线进行计算, 发现拉伸过程可分为弹性形变、塑性形变及断裂3个阶段. 分别研究了含有不同浓度的空位、自间隙杂质原子、杂质He原子缺陷的金属Ti样品在2×10^{9} s^{-1}拉伸应变速率下的应力-应变曲线, 并对不同情况下的Young′s模量进行了统计. 还分别对含有自间隙杂质原子和杂质He原子的金属Ti的拉伸断裂过程进行了观察与分析.

关键词 缺陷, 力学性能, 分子动力学模拟

中图法分类号 TL341 **文献标识码** A **文章编号** 0412-1961(2015)01-0107-07

A SIMULATION STUDY OF MECHANICAL PROPERTIES OF METAL Ti SAMPLE WITH DEFECTS

LIANG Li, MA Mingwang, TAN Xiaohua, XIANG Wei, WANG Yuan, CHENG Yanlin

China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999

Correspondent: MA Mingwang, associate professor, Tel: (0816)2489785, E-mail: caepiee@163.com

Supported by National Natural Science Foundation of China (No.51406187), Science and Technology Development Foundation of China Academy of Engineering Physics (No.2014B0401060) and Technology Innovation Foundation of Institute of Electronic Engineering, China Academy of Engineering Physics (No.S20140805)

Manuscript received 2014-06-25, in revised form 2014-10-21

ABSTRACT The effect of defects in metal Ti such as vacancies, self-interstitial atoms and impurity He atoms on mechanical properties of metal Ti sample was studied using molecular dynamics simulation. First, the stress-strain curves of perfect Ti sample at different strain rates were calculated. The results show that the stretching process can roughly be divided into three stages, elastic deformation, plastic deformation and fracturing. For comparison the stress-strain curves of metal Ti samples with vacancies, self-interstitial atoms and impurity He atoms were researched, respectively, in which the strain rate was set as 2×10^{9} s^{-1}. Finally the corresponding Young′s moduli were calculated. It is found that after carefully investigating that the mechanical properties of metal Ti are degraded by each of these effects in it and the degradation degree increases with increasing defect concentration. However, the stretching process of samples is not essentially affected by these effects (the stress-strain curves of Ti samples with defects have still 3 stages). In this process, self-interstitial atoms in samples always exist for they to be bonded by metal Ti atoms, but impurity He atoms in samples are released due to their extraordinarily low solution in metal Ti.

KEY WORDS defect, mechanical property, molecular dynamics simulation

*国家自然科学基金项目51406187, 中国工程物理研究院科学技术发展基金项目2014B0401060和中国工程物理研究院电子工程研究所科技创新基金项目S20140805项目

收到初稿日期: 2014-06-25, 收到修改稿日期: 2014-10-21

作者简介: 梁 力, 女, 1986年生, 助理研究员

DOI: 10.11900/0412.1961.2014.00336

金属Ti及其合金由于熔点高, 密度小(约4.5 g/cm^3), 比强度大, 高低温性能好, 且具有较好的抗冲击性, 同时在海水及多数酸、碱、盐环境中有良好的耐腐蚀性, 因此被广泛应用于生物技术、化工、汽车、航空、航天、能源和核工业等诸多领域[1~5]. 在这些应用领域中, 金属Ti往往是不可或缺的结构材料, 这是因为它在力学性能方面具有其他金属无法比拟的优势. 纯度为99.2%的Ti, 其抗张强度为434 MPa, 与低等级的合金钢基本相同, 但Ti的质量比合金钢轻45%; Ti的机械强度是金属Al的2倍, 但其密度只比Al高60%. 如此高的强度结合其较小的比重, 形成了金属Ti比强度大的优点.

目前为止, 人们对常规条件下金属Ti的力学性能及其机理的研究已经有了较为深刻的理解与认识[6~13]. 但随着金属Ti应用领域的扩展, 如核反应堆中的Ti零件等, 使得含缺陷的金属Ti, 尤其是含空位、He杂质等缺陷的金属Ti的力学性能的研究变得尤为重要, 但目前关于此内容的研究工作开展尚少. Senkov等[14]采用激光超声波方法研究了H原子杂质对α-Ti和β-Ti弹性模量的影响, 指出渗氢使α-Ti弹性模量和剪切模量降低, 而β-Ti弹性模量与剪切模量随H含量的增加而增大, 即氢致α相软化, β相硬化. 韩秀丽等[15]分别运用第一原理与分子动力学方法对金属Ti中不同位置及不同含量的H对其弹性模量的影响进行了分析, 得到了与Senkov等[14]相同的结果. 但迄今为止, 空位及杂质He原子等缺陷对金属Ti的拉伸力学性能的影响还没有展开深入系统的研究.

本工作运用分子动力学模拟方法对完整单晶纯Ti在不同拉伸应变速率下的应力-应变曲线进行计算, 研究了杂质He原子缺陷对金属Ti的应力-应变曲线及Young′s模量等力学参量的影响. 为了对比分析, 对不同掺杂浓度的空位与自间隙Ti原子缺陷的情况进行了研究. 还分别对含有自间隙Ti原子和He原子杂质的金属Ti的拉伸断裂过程进行了观察.

1 模拟方法

本模拟工作利用的软件为经典分子动力学(MD)模拟软件Lammps. 建立的金属Ti体系为hcp结构, 大小为10.2 nm×11.8 nm×9.3 nm, 共包含64000个原子. 模拟样品的(100), (001)和(010)方向均采用周期性边界条件, 时间步长取为1×10^{-15} s. 金属Ti原子之间的相互作用由EAM (embedded atom method)[16]作用势描述, 作用势具体参数设置参见文献[17]. Ti和He原子之间的作用势$V(r)$通过第一原理方法拟合而得[18], 形式如下:

$$V(r)=\varepsilon[(\frac{r_0}{r})^{4.35}-3.21(\frac{r_0}{r})^{1.4}] \quad (1)$$

式中, r表示原子间的距离, 势阱深度ε=0.02617 eV, 势能最低时原子之间的平衡距离r_0=0.47288 nm. He原子之间的相互作用采用Lennard-Jones作用势[19] $V(r)$描述:

$$V(r)=\varepsilon[(\frac{r_0}{r})^{12}-2(\frac{r_0}{r})^{6}] \quad (2)$$

其中, ε=0.000876 eV, r_0=0.2559 nm.

模拟过程中首先对完整晶体的金属Ti样品进行1×10^{-10} s的弛豫, 以使其达到平衡状态. 然后, 对弛豫后的样品进行拉伸, 沿y轴方向施加应变, 并对拉伸应变速率为2×10^8, 5×10^8, 1×10^9, 2×10^{9}和5×10^9 s^{-1}的情况分别进行了模拟. 拉伸中每施加一定量的应变, 模拟体系将弛豫100步, 即10^{-13} s, 以使系统原子恢复到准平衡状态, 如此重复拉伸、弛豫的过程, 直至样品被拉断为止.

为在完整晶格结构的金属Ti中形成空位缺陷, 从完整晶格体系的64000个原子中随机去掉一定比例的Ti原子, 然后将模拟体系在NPT系综下弛豫1×10^{-10} s, 以使其达到平衡状态. 为形成间隙原子缺陷, 在完整晶格体系中随机添加一定数目的Ti或He原子, 然后将体系进行弛豫, 避免出现原子间距太近的现象. 含缺陷的模拟体系的拉伸过程与完整晶格结构的金属Ti的拉伸过程相似, 沿y轴方向施加应变, 拉伸应变速率选为2×10^9 s^{-1}. 拉伸中每施加0.0002的应变, 模拟体系被弛豫100步, 如此不断反复直至样品被拉断.

2 结果与分析

本模拟中, 首先对完整晶格的金属Ti在不同拉伸应变速率下的应力-应变曲线进行计算. 然后对He原子杂质给金属Ti力学性能带来的影响进行了模拟. 为了对比分析, 在此之前先分别研究了含有不同浓度的空位和自间隙杂质原子金属Ti样品在2×10^9 s^{-1}拉伸应变速率下的应力-应变曲线, 并对不同情况下的Young′s模量进行了统计. 最后还分别对含有自间隙杂质原子和He原子杂质的金属Ti的拉伸断裂过程进行了观察与分析.

2.1 完整晶格结构的金属Ti的力学性能

已有实验表明, 应变速率对材料的强度有一定的影响[20], 但对不同材料影响的程度有所差异. 因

此, 研究金属 Ti 力学性能的应变速率相关性十分有意义. 本模拟选取的拉伸应变速率分别为 2×10^8, 5×10^8, 1×10^9, 2×10^9 和 5×10^9 s^{-1}. 图 1 给出了完整金属 Ti 样品在不同应变速率下的应力-应变曲线. 可以看出, 不同拉伸应变速率下, 金属 Ti 的应力-应变曲线可分为以下 3 个阶段: (1) 在应变小于 0.05 的范围内, 金属 Ti 经历弹性形变阶段, 此时应力随应变的增大呈线性增长趋势, 变形符合 Hooke 定律, 这一阶段 Ti 原子虽然已经偏离平衡位置, 但只有样品晶格尺寸发生变化, 并没有金属键的断裂; (2) 继续拉伸, 在应变约为 0.05 到 0.12 的范围内, 金属 Ti 的应力-应变曲线开始变得平缓, 且不再为线性关系, 说明拉伸已由弹性形变转变为塑性形变, 开始出现局部金属键断裂的现象; (3) 当应变增大到约 0.13 时, 随应变增大应力迅速下降, 样品在瞬间发生断裂, 随着拉伸的进行, 接触原子越来越少, 两端发生分离. 对图 1 中应变为 0~0.03 的区间采用最小二乘法进行线性拟合, 可以得到各拉伸应变速率下金属 Ti 样品的 Young′s 模量均在 130 GPa 左右, 这与实验结果(116 GPa)[21]比较接近.

表 1 列出了完整金属 Ti 样品在不同拉伸应变速率下的 Young′s 模量、拉伸强度及断裂应变. 可以看出, 随样品拉伸应变速率的增加, Young′s 模量始终在 130 GPa 左右波动, 无明显的变化. 但拉伸强度与断裂应变均随拉伸应变速率的增加呈增大趋势, 即出现了应变率强化效应.

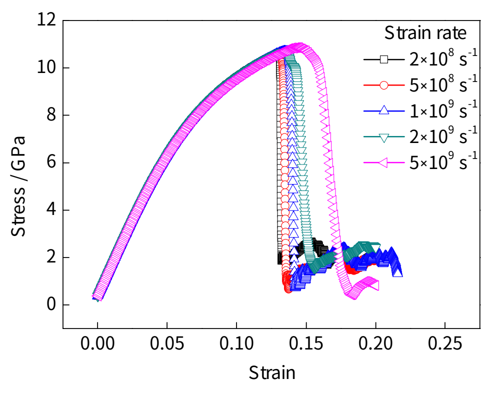


图 1 不同拉伸应变速率下完整晶格金属 Ti 的应力-应变曲线

Fig.1 Stress-strain curves of perfect metal Ti samples at different strain rates

表 1 完整金属 Ti 样品在不同拉伸应变速率下的 Young′s 模量、拉伸强度与断裂应变

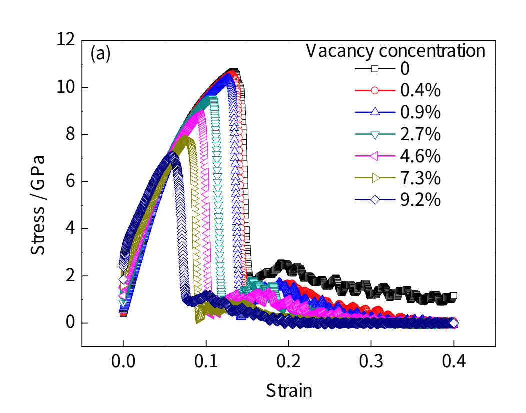
Table 1 Young′s moduli, tensile strengths and fracture strains of perfect metal Ti samples at different strain rates

Strain rate / s^{-1}	Young′s modulus / GPa	Tensile strength / GPa	Fracture strain
2×10^8	128.47	10.62	0.130
5×10^8	132.03	10.65	0.131
1×10^9	129.09	10.72	0.135
2×10^9	130.08	10.68	0.133
5×10^9	129.98	10.86	0.144

2.2 含缺陷的金属 Ti 样品的力学性能

2.2.1 含空位缺陷金属 Ti 样品的力学性能　为研究空位缺陷对金属 Ti 力学性能造成的影响, 分别从完整 Ti 样品内部随机去除不同数目的原子, 以形成空位浓度分别为 0.4%, 0.9%, 2.7%, 4.6%, 7.3% 和 9.2% 的样品, 然后对以上样品以 2×10^9 s^{-1} 的应变速率进行拉伸, 得到的应力-应变曲线如图 2a 所示. 可以看出, 不论金属 Ti 样品的空位缺陷浓度多大, 其应力-应变曲线的形状没有发生本质的变化, 即拉伸过程仍然经历了弹性形变、塑性形变与断裂 3 个阶段. 但有空位缺陷的样品的断裂应变和抗拉强度均比完整晶格结构的金属 Ti 小, 且随空位浓度增大, 断裂应变和抗拉强度均逐渐降低, 如表 2 所示. 对图 2a 中应变为 0~0.03 的区间采用最小二乘法进行线性拟合, 得到模拟样品 Young′s 模量随空位缺陷浓度的变化规律, 如图 2b 所示. 可以看出, 样品 Young′s 模量与空位浓度基本呈线性反比关系, 且 Young′s 模量的下降程度较大. 空位浓度为 9.2% 的金属 Ti 样品的 Young′s 模量为 76 GPa, 比完整晶格的 130 GPa 下降了 41.5%, 说明金属 Ti 内的空位缺陷对其力学性能的影响较为严重.

2.2.2 含自间隙杂质原子的金属 Ti 样品的力学性能　为了研究金属 Ti 中自间隙杂质原子缺陷给力学性能带来的影响, 分别在完整金属 Ti 样品内随机位置添加 200, 500, 800, 1000 和 2000 个 Ti 原子, 以形成自间隙杂质浓度分别为 0.3%, 0.8%, 1.3%, 1.6% 和 3.1% 的样品, 并对以上样品以 2×10^9 s^{-1} 的拉伸应变速率进行拉伸, 得到的应力-应变曲线如图 3a 所示. 可以看出, 与空位杂质不同的是, 含自间隙杂质原子缺陷的模拟体系的断裂应变与抗拉强度虽均小于完整晶格 Ti 样品, 但二者随缺陷浓度的变化



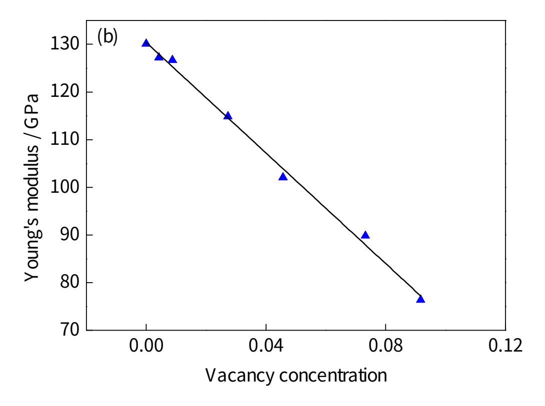


图 2 含有不同空位浓度的金属Ti的应力-应变曲线及Young's模量与空位浓度的关系

Fig.2 Stress-strain curves with different vacancy concentrations (a) and the relationship between Young's modulus and vacancy concentration (b) of metal Ti samples

表 2 含不同浓度空位金属Ti样品的Young's模量、抗拉强度与断裂应变

Table 2 Young's moduli, tensile strengths and fracture strains of metal Ti samples with different vacancy concentrations

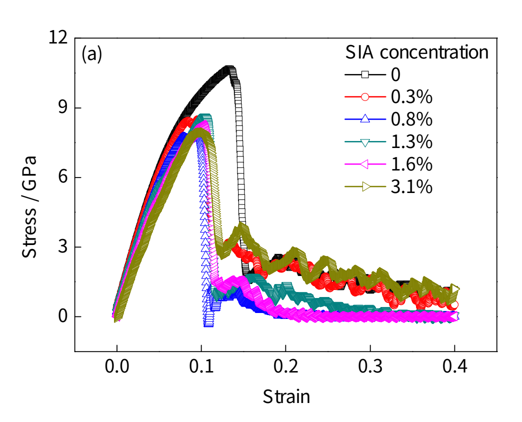
Vacancy concentration / %	Young's modulus / GPa	Tensile strength / GPa	Fracture strain
0	130.08	10.68	0.133
0.4	127.23	10.57	0.132
0.9	126.71	10.40	0.127
2.7	114.90	9.55	0.107
4.6	102.08	8.86	0.093
7.3	89.85	7.80	0.077
9.2	76.42	7.12	0.059

趋势并不明显, 如表3所示. 对图3a中应变范围为0~0.03区间的应力-应变曲线采用最小二乘法进行线性拟合, 发现样品的Young's模量随自间隙杂质原子浓度的增大而线性下降, 如图3b所示, 且Young's模量的下降程度较大. 自间隙杂质原子浓度为3.1%的金属Ti样品的Young's模量从完整晶格的130 GPa下降到了110 GPa, 自间隙原子给金属Ti样品的Young's模量带来的影响程度与空位缺陷基本相当. 这说明金属Ti内自间隙杂质原子缺陷也较严重地降低了其力学性能.

从图3a还可以看出, 自间隙杂质原子的出现并没有使模拟样品的应力-应变曲线造成本质的改变, 拉伸过程仍可分为弹性形变、塑性形变与断裂3个阶段. 图4所示为自间隙杂质原子浓度为3.1%的金属Ti样品在不同应变下拉伸的形貌, 一个橘黄色圆球代表一个晶格Ti原子, 一个绿色圆球则代表一个杂质Ti原子. 图4a为自间隙杂质原子浓度为3.1%的模拟样品在应变为0.05时的形貌. 可以看出, 金属键虽被拉伸变形但并未发生断裂, 从图3a中亦可看出, 在0~0.05的应变范围内应力与应变仍呈线性关系, 此拉伸阶段样品发生的是弹性形变. 图4b为应变为0.1时的样品形貌. 可以看出, 已有部分金属键发生断裂, 说明拉伸已进入塑性形变阶段, 此阶段对应图3a中0.05~0.1的应变范围, 应力-应变曲线开始变得平缓, 不再呈线性关系. 图4c和d均为样品断裂后的形貌. 可以看出, 随着拉伸的进行, 接触原子越来越少, 两端发生分离, 此阶段对应图3a中应变大于0.1范围内的应力-应变曲线, 随应变继续增大, 应力出现急剧下降的现象.

2.3 含杂质He原子的金属Ti样品的力学性能

为了研究金属Ti中杂质He原子的掺杂给其力学性能带来的影响, 依次在完整金属Ti样品内随机位置添加200, 500, 800, 1000和2000个He原子, 以形成He原子杂质浓度分别为0.3%, 0.8%, 1.3%, 1.6%和3.1%的样品. 对以上样品仍以2×10^{9} s^{-1}的拉伸应变速率进行拉伸, 得到的应力-应变曲线如图5a所示. 可以看出, He原子杂质同样没有对应力-应变曲线造成本质影响, 拉伸过程仍可分为弹性形变、塑性形变与断裂3个阶段, 这与空位缺陷和自间隙杂质原子缺陷的结果是一致的. 对图5a中应变范围



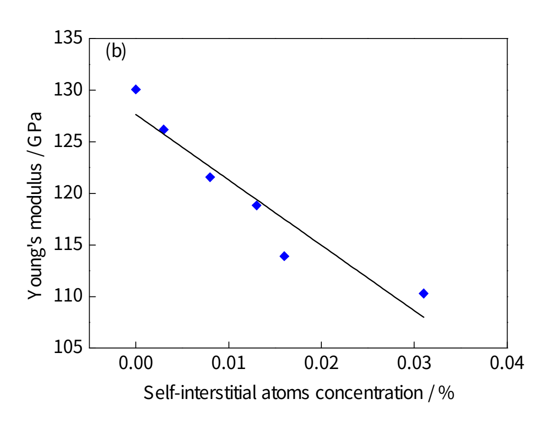


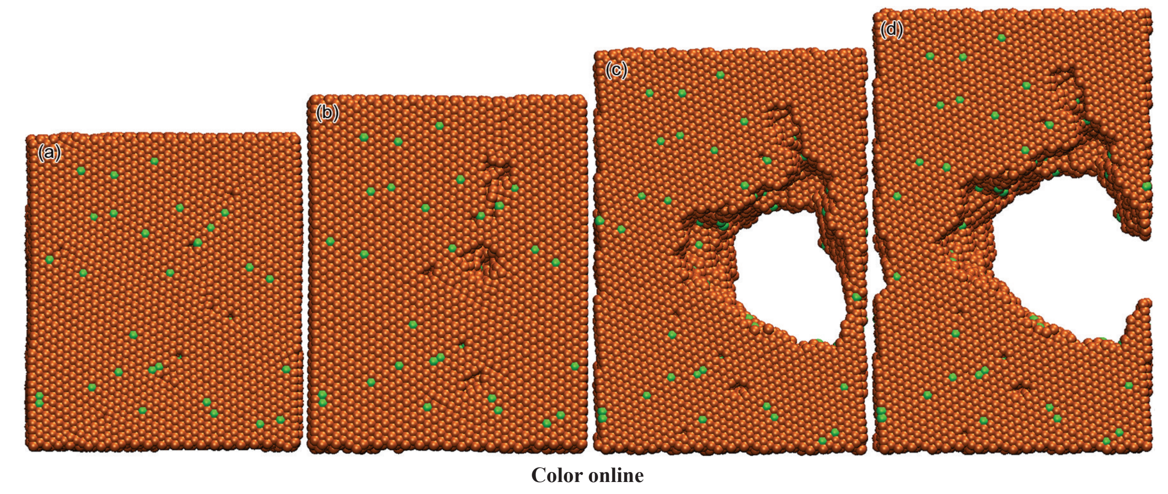
图 3 含有不同自间隙杂质原子浓度的金属 Ti 的应力-应变曲线及 Young's 模量与自间隙杂质原子浓度的关系

Fig.3 Stress-strain curves with different self-interstitial atom (SIA) concentrations (a) and the relationship between Young's modulus and SIA concentration (b) of metal Ti samples

表 3 含自间隙素质原子金属 Ti 样品的 Young's 模量、抗拉强度与断裂应变

Table 3 Young's moduli, tensile strengths and fracture strains of metal Ti samples with different SIA concentrations

SIA concentration / %	Young's modulus / GPa	Tensile strength / GPa	Fracture strain
0	130.08	10.68	0.133
0.3	126.18	8.49	0.095
0.8	121.57	7.99	0.096
1.3	118.83	8.63	0.104
1.6	113.92	8.27	0.102
3.1	110.30	7.95	0.102



Color online

图 4 自间隙杂质原子浓度为3.1%的金属 Ti 样品在不同应变下拉伸的形貌图

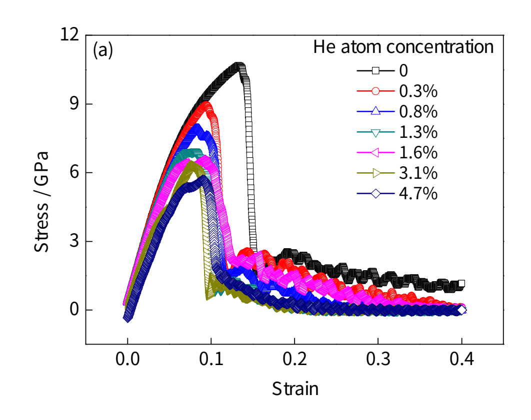
Fig.4 Morphologies of metal Ti samples with 3.1% SIA concentration at strains of 0.05 (a), 0.10 (b), 0.30 (c) and 0.40 (d) (The orange sphere represents a lattice Ti atom, and the green sphere a SIA)

为 0~0.03 区间的应力-应变曲线采用最小二乘法进行线性拟合, 得到模拟样品的 Young's 模量随杂质 He 原子浓度的变化趋势, 如图 5b 所示. 可以看出, 与空位缺陷和自间隙原子的情况类似, 样品的 Young's 模量仍与杂质 He 原子浓度呈线性反比关系, 但不同的是杂质 He 原子对 Young's 模量的影响程度略小于前两者.

表 4 中列出了含不同浓度杂质 He 原子的金属 Ti 样品在不同拉伸应变速率下的 Young's 模量、抗拉强度与断裂应变. 可以看出, 样品的抗拉强度与断裂应变均随杂质 He 原子缺陷浓度的增大呈下降趋势, 且抗拉强度的下降程度较大, 如完整金属 Ti

样品的抗拉强度为10.68 GPa, 而杂质He原子浓度为3.1%的样品的抗拉强度则下降到了6.33 GPa, 下降程度接近41%, 比相同浓度的自间隙杂质缺陷造成的影响程度要大. 综上所述, 杂质He原子缺陷同样会较大程度地降低金属Ti样品的拉伸力学性能.

图6为杂质He原子浓度为3.1%的金属Ti样品在不同应变下拉伸的形貌图, 一个橘黄色圆球代表一个晶格Ti原子, 一个蓝色圆球代表一个杂质He



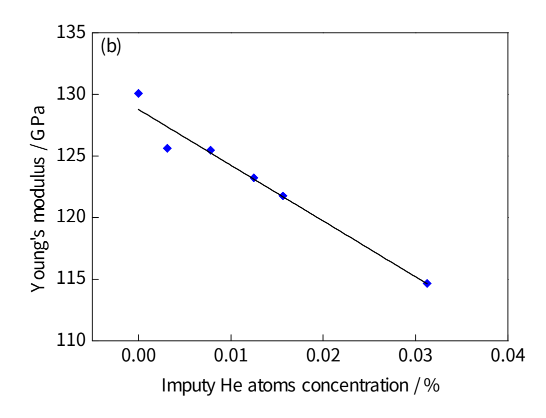


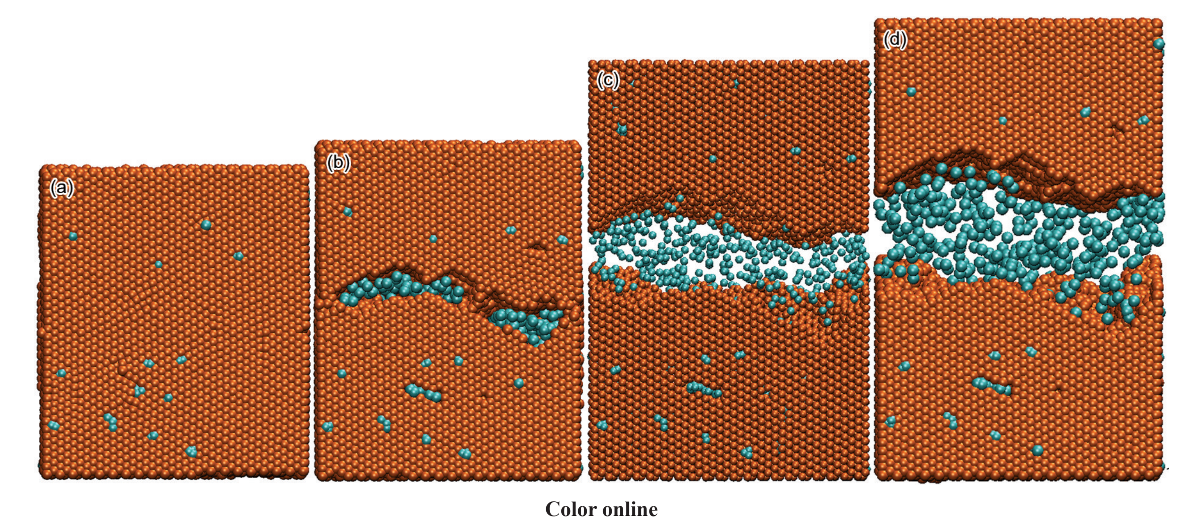
图5 含有不同杂质He原子浓度的金属Ti的应力-应变曲线及Young's模量与杂质He原子浓度的关系

Fig.5 Stress-strain curves with different impurity He atom concentrations (a) and the relationship between Young's modulus and impurity He atom concentration (b) of metal Ti samples

表4 含杂质He原子金属Ti样品在不同拉伸应变速率下的Young's模量、抗拉强度与断裂应变

Table 4 Young's moduli, tensile strengths and fracture strains of metal Ti samples with different impurity He atom concentrations

Impurity He atom concentration / %	Young's modulus / GPa	Tensile strength / GPa	Fracture strain
0	130.08	10.68	0.133
0.3	125.62	8.95	0.094
0.8	125.48	7.93	0.084
1.3	123.24	6.93	0.080
1.6	121.76	6.57	0.089
3.1	114.67	6.33	0.079



Color online

图6 杂质He原子浓度为3.1%的金属Ti样品在不同应变下拉伸的形貌图

Fig.6 Morphologies of metal Ti samples with 3.1% impurity He atom concentration at different strains of 0.05 (a), 0.10 (b), 0.30 (c) and 0.40 (d) (The orange sphere represents a lattice Ti atom and the green sphere represents an impurity He atom)

原子. 图 6a 对应样品弹性形变阶段, 图 6b 对应塑性形变阶段, 图 6c 和 d 对应样品断裂阶段. 将含杂质 He 原子的金属 Ti 样品拉伸过程(图 6)与含自间隙杂质原子的金属 Ti 样品拉伸过程(图 4)进行对比可以发现, 在金属 Ti 的拉伸断裂过程中, 自间隙杂质原子始终在样品中, 而断裂面附近的杂质 He 原子却从样品断裂处大量析出, 不再在金属 Ti 内部. 这是因为, He 原子作为惰性气体原子在金属材料内的溶解度非常低[22~24], 且极易在间隙位置处发生扩散[22,25], 从而断裂面附近的 He 原子能轻易地从断裂面处释放出来, 而自间隙原子与基体金属 Ti 之间存在着较强的金属键, 由于金属键的作用, 自间隙原子被牢牢地束缚在样品内部, 不能释放出来.

3 结论

(1) 对完整晶格的金属 Ti 在不同拉伸应变速率下的应力-应变曲线的计算发现, 应变速率会在一定程度上影响样品的力学性能, 但对拉伸过程没有本质影响, 拉伸过程均可分为弹性形变、塑性形变及断裂 3 个阶段.

(2) 空位、自间隙杂质原子及杂质 He 原子 3 种缺陷的出现均降低了金属 Ti 的力学性能, 且缺陷浓度越大, 影响越严重, 但缺陷的出现并没有对拉伸过程造成本质的影响.

(3) 对含有自间隙杂质原子和杂质 He 原子的金属 Ti 的拉伸断裂过程的观察与分析发现, 在金属 Ti 的拉伸断裂过程中, 自间隙杂质原子因金属键的作用始终被约束在样品中, 而断裂面附近的杂质 He 原子则由于其在金属材料中的溶解度极低而从样品断裂处析出.

参考文献

[1] Boyer R R. *Mater Sci Eng*, 1996; A213: 103

[2] Wang K. *Mater Sci Eng*, 1996; A213: 134

[3] Geetha M, Singh A K, Asokamani R, Gogia A K. *Prog Mater Sci*, 2009; 54: 397

[4] Gurrappa I. *Mater Charact*, 2003; 51: 131

[5] Rack H J, Qazi J I. *Mater Sci Eng*, 2006; C26: 1269

[6] Wulf G L. *Int J Mech Sci*, 1979; 21: 713

[7] Lawson J E, Nicholas T. *J Mech Phys Solids*, 1972; 20: 65

[8] Sheikh-Ahmad J Y, Bailey J A. *J Eng Mater Technol*, 1995; 117: 139

[9] Chichili D R, Ramesh K T, Hemker K J. *Acta Mater*, 1998; 46: 1025

[10] Nemat-Nasser S, Guo W G, Cheng J Y. *Acta Mater*, 1999; 47: 3705

[11] Zhou F H, Wright T W, Ramesh K T. *J Mech Phys Solids*, 2006; 54: 904

[12] Zeng Z P, Jonsson S, Roven H J. *Acta Mater*, 2009; 57: 5822

[13] Xu Y B, Zhang J H, Bai Y L. *Metall Mater Trans*, 2008; 39A: 811

[14] Senkov O N, Dubios M, Jonas J J. *Metall Mater Trans*, 1996; 27A: 3963

[15] Han X L, Wang Q, Sun D L, Sun T, Guo Q. *Mater Sci Technol*, 2009; 17: 305
(韩秀丽, 王 清, 孙东立, 孙 涛, 郭 强. 材料科学与工艺, 2009; 17: 305)

[16] Daw M S, Baskes M I. *Phys Rev*, 1984; 29B: 6443

[17] Ackland G J. *Philos Mag*, 1992; 66A: 917

[18] Wang J, Hou Q, Sun T Y, Wu Z C, Long X G, Wu X C, Luo S Z. *Chin Phys Lett*, 2006; 23: 1666

[19] Jorgensen W L, Chandrasekhar J, Madura J D, Impey R W, Klein M L. *J Chem Phys*, 1983; 79: 926

[20] Lee W S, Lin C F. *Mater Sci Eng*, 2001; A308: 124

[21] Setoyama D, Matsunaga J, Muta H, Uno M, Yamanaka S. *J Alloys Compd*, 2004; 381: 215

[22] Rajainmaki H, Linderoth S, Hansen H E, Nieminen R M, Bentzon M D. *Phys Rev*, 1988; 38B: 1087

[23] Singh A, Maji S, Nambissan P M G. *J Phys: Condens Mater*, 2001; 13: 177

[24] Trinkaus H, Singh B N. *J Nucl Mater*, 2003; 323: 229

[25] Iwakiri H, Yasunaga K, Morishita K, Yoshida N. *J Nucl Mater*, 2000; 283-287: 1134

(责任编辑:肖素红)

